

**сообщения  
объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
дубна**

**P14-84-498**

**И.Пэдуреану, Г.Ротареску, С.Рапеану,  
А.Г.Новиков, Н.К.Фомичев**

**ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫЕ  
КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ  
ЖИДКОГО НАТРИЯ**

**1984**

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Из экспериментов по неупругому рассеянию медленных нейтронов можно извлечь информацию как об усредненном движении отдельного атома в поле соседей, так и о коллективном движении атомов. Первое может быть изучено посредством некогерентного рассеяния нейтронов, тогда как последнее связано с когерентным рассеянием.

Ван-Хов был первым, кто ввел для описания движения частиц вещества корреляционные пространственно-временные функции: автокорреляционную  $G_s(\vec{r}, t)$  и парную корреляционную  $G_d(\vec{r}, t)$  и установил их связь с дважды-дифференциальными сечениями некогерентного и когерентного рассеяния медленных нейтронов <sup>/1/</sup>.

Автокорреляционная пространственно-временная функция /АКПВФ/  $G_s(\vec{r}, t)$  может быть определена как вероятность обнаружить частицу в точке  $\vec{r}$  в момент времени  $t$ , если при  $t = 0$  эта частица находилась в  $\vec{r} = 0$ . Парная корреляционная пространственно-временная функция /ПКПВФ/  $G_d(\vec{r}, t)$ , являющаяся в случае жидкости обобщением функции радиального распределения /ФРР/  $g(\vec{r})$ , определяет вероятность обнаружить какой-либо атом в момент времени  $t$  в точке  $\vec{r}$ , если другой атом при  $t = 0$  находился в  $\vec{r} = 0$ .

Наиболее широкое и плодотворное применение метод пространственно-временных корреляционных функций /ПВКФ/ нашел при описании жидкостей. Основными источниками информации о нем являются в настоящее время молекулярно-динамические /МД/ расчеты и эксперименты по неупругому рассеянию медленных нейтронов. Методом МД были получены ПВКФ для жидкого аргона <sup>/2/</sup>, жидкого рубидия <sup>/3/</sup>, жидкого натрия <sup>/4/</sup>. Из экспериментальных данных по неупругому рассеянию медленных нейтронов была извлечена информация о ПВКФ для жидкого натрия <sup>/5/</sup> и жидкого рубидия <sup>/6/</sup>.

В настоящей работе описаны результаты извлечения промежуточной функции рассеяния, а также АКПВФ и ПКПВФ из динамической функции рассеяния  $S(Q, \omega)$  жидкого натрия, полученной ранее экспериментально при температуре 413 К <sup>/7/</sup>. Найденные ПВКФ позволяют составить представление о пространственно-временном поведении атомов жидкого натрия и оценить пространственные области и временные интервалы существования автокорреляций и парных корреляций. Промежуточная функция рассеяния используется для получения структурных характеристик жидкого натрия /структурного фактора и функции радиального распределения/. Из последней, в свою очередь, извлекается информация о потенциале парного взаимодействия /ПВВ/ в жидком натрии.



## 2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ

Как показал Ван-Хов<sup>/1/</sup>, дважды дифференциальные сечения некогерентного и когерентного рассеяния медленных нейтронов веществ могут быть представлены в виде:

$$\frac{d^2 \sigma_{\text{нког.}}}{d\Omega d\omega} = \frac{k}{k_0} \frac{\sigma_{\text{нког.}}}{4\pi} S_{\text{нког.}}(\mathbf{Q}, \omega); \quad \frac{d^2 \sigma_{\text{ког.}}}{d\Omega d\omega} = \frac{k}{k_0} \frac{\sigma_{\text{ког.}}}{4\pi} S_{\text{ког.}}(\mathbf{Q}, \omega),$$

где  $\sigma_{\text{нког.}}$  и  $\sigma_{\text{ког.}}$  - полные сечения некогерентного и когерентного рассеяния;  $\vec{Q} = \vec{k} - \vec{k}_0$  - изменение импульса нейтрона при рассеянии;  $\hbar\omega = E - E_0$  - изменение энергии нейтрона при рассеянии;  $S_{\text{нког.}}(\mathbf{Q}, \omega)$  и  $S_{\text{ког.}}(\mathbf{Q}, \omega)$  - динамические функции некогерентного и когерентного рассеяния, связанные с АКПВФ и ПКПВФ соотношениями:

$$S_{\text{нког.}}(\mathbf{Q}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp[i(\vec{Q}\vec{r} - \omega t)] G_s(\vec{r}, t) d\vec{r} dt, \\ S_{\text{ког.}}(\mathbf{Q}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp[i(\vec{Q}\vec{r} - \omega t)] G_d(\vec{r}, t) d\vec{r} dt, \quad /2/$$

$G(\vec{r}, t) = G_s(\vec{r}, t) + G_d(\vec{r}, t)$  - полная ПКВФ.

Для классической системы корреляционные функции  $G_s$  и  $G_d$  являются действительными. В момент времени  $t = 0$ :

$$G_s(\vec{r}, t)|_{t \rightarrow 0} = \delta(\vec{r}); \quad G_d(\vec{r}, t)|_{t \rightarrow 0} = n g(\vec{r}), \quad /3/$$

где  $n$  - число атомов в единице объема.

Видно, таким образом, что при  $t = 0$   $G_s$  и  $G_d$  обладают ярко выраженной локальной структурой. Постепенно, по мере того, как время увеличивается, эта структура исчезает, и при  $t \rightarrow \infty$  обе функции оказываются пространственно-независимыми:

$$G_s(\vec{r}, t)|_{t \rightarrow \infty} = 0; \quad G_d(\vec{r}, t)|_{t \rightarrow \infty} = G(\vec{r}, t)|_{t \rightarrow \infty} = n. \quad /4/$$

То же самое происходит и на больших расстояниях:

$$G_s(\vec{r}, t)|_{r \rightarrow \infty} = 0; \quad G(\vec{r}, t)|_{r \rightarrow \infty} = G(\vec{r}, t)|_{r \rightarrow \infty} = n. \quad /5/$$

Пространственно-временные корреляционные функции  $G_s(\vec{r}, t)$  и  $G(\vec{r}, t)$  связаны с промежуточными функциями рассеяния  $F_s(\mathbf{Q}, t)$  и  $F(\mathbf{Q}, t)$  обратным фурье-преобразованием:

$$G_s(\vec{r}, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\vec{Q}\vec{r}) F_s(\mathbf{Q}, t) d\mathbf{Q},$$

$$G(\vec{r}, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\vec{Q}\vec{r}) F(\mathbf{Q}, t) d\mathbf{Q}, \quad /6/$$

они, в свою очередь, могут быть выражены через динамические функции рассеяния  $S_{\text{нког.}}(\mathbf{Q}, \omega)$  и  $S_{\text{ког.}}(\mathbf{Q}, \omega)$ :

$$F_s(\mathbf{Q}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega t) S_{\text{нког.}}(\mathbf{Q}, \omega) d\omega, \\ F(\mathbf{Q}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega t) S_{\text{ког.}}(\mathbf{Q}, \omega) d\omega. \quad /7/$$

Из последнего выражения следует, что

$$F(\mathbf{Q}, t)|_{t \rightarrow 0} = \int_{-\infty}^{\infty} S(\mathbf{Q}, \omega) d\omega = S(\mathbf{Q}), \quad /8/$$

где  $S(\mathbf{Q})$  - статистический структурный фактор, связанный с дифференциальным по углу сечением когерентного рассеяния:

$$\frac{d\sigma_{\text{ког.}}}{d\Omega} = \frac{\sigma_{\text{ког.}}}{4\pi} S(\mathbf{Q}) = \frac{\sigma_{\text{ког.}}}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\vec{Q}\vec{r}) [G(\vec{r}, 0) - n] d\vec{r}. \quad /9/$$

Для классической жидкости соотношения /6/ и /7/ оказываются более простыми<sup>/8/</sup>:

$$G(\vec{r}, t) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{\infty} F(\mathbf{Q}, t) \frac{\sin Qr}{Qr} Q^2 dQ, \\ F(\mathbf{Q}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\mathbf{Q}, \omega) \cos \omega t d\omega. \quad /10/$$

Такие же соотношения справедливы для  $G_s(\vec{r}, t)$  и  $F_s(\mathbf{Q}, t)$ .

Поскольку сечение рассеяния жидкого натрия содержит как когерентную, так и некогерентную составляющие, полная динамическая функция рассеяния дается выражением:

$$S(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{\sigma_{\text{нког.}}}{\sigma_{\text{полн.}}} S_{\text{нког.}}(\mathbf{Q}, \omega) + \frac{\sigma_{\text{ког.}}}{\sigma_{\text{полн.}}} S_{\text{ког.}}(\mathbf{Q}, \omega), \quad /11/$$

где  $\sigma_{\text{полн.}} = \sigma_{\text{нког.}} + \sigma_{\text{ког.}}$  - полное сечение рассеяния. В этом случае фурье-преобразование /6/ с учетом /11/ дает комбинацию КПВФ в виде:

$$G_s(\vec{r}, t) + \frac{\sigma_{\text{ког.}}}{\sigma_{\text{полн.}}} G_d(\vec{r}, t). \quad /12/$$

Полезно знать, как выглядит  $G(\vec{r}, t)$  при очень малых /модель идеального газа/ и очень больших /модель диффузии/ периодах времени<sup>/8/</sup>:

$$G_s^{\text{газ}}(r, t) = \left(\frac{M}{2KT\pi t^2}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{r^2}{(2KT/M)t^2}\right),$$

$$G_s^{\text{диф.}}(r, t) = \left(\frac{1}{4\pi D|t|}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{r^2}{4D|t|}\right), \quad /13/$$

где  $M$  - масса частицы,  $D$  - коэффициент самодиффузии. Величины

$$W_{\text{газ}}(t) = \left(\frac{2KT}{M}\right)^{1/2} t; \quad W_{\text{диф.}}(t) = 2(D|t|)^{1/2} \quad /14/$$

определяют расстояние, на котором  $G_s(r, t)$  спадает в  $e$  раз. Эти модели будут полезны при анализе результатов, полученных из экспериментальных данных.

### 3. ПРОМЕЖУТОЧНАЯ ФУНКЦИЯ РАССЕЯНИЯ

Имея  $S(Q, \omega)$ , промежуточную функцию рассеяния  $F(Q, t)$  можно рассчитать по соотношению /10/. Промежуточная функция рассеяния является мерой флуктуаций плотности системы как функция времени. В пределе  $t \rightarrow 0$  промежуточная функция рассеяния определяется структурой жидкости /см./8//:

$$F(Q, t) |_{t \rightarrow 0} \rightarrow S(Q) = 1 + n \int \exp(-iQr) [g(r) - 1] dr. \quad /15/$$

$F(Q, t)$  была получена из экспериментальных данных по соотношению /10/. Прежде чем выполнить этот расчет, из экспериментальной динамической функции рассеяния  $S(Q, \omega)$  мы удалили ее некогерентную составляющую /см./11//, которая рассчитывалась на основе теоретической модели, предложенной в /9/.

Промежуточная функция рассеяния  $F(Q, t)$  как функция  $Q$  для различных моментов времени показана на рис.1. Как уже говорилось,  $F(Q, t)$  при  $t \rightarrow 0$  становится структурным фактором, а при  $t \neq 0$  дает возможность наблюдать за изменением локальной структуры жидкости в направлении  $Q$ . Как следует из рис.1, заметные изменения структуры жидкости наблюдаются вплоть до времени  $t \approx 1,5 \cdot 10^{-12}$  с.

На рис.2  $F(Q, t)$  представлена как функция времени для различных значений  $Q$ . На основе зависимости  $F(Q, t)$  можно сделать вывод о сложном характере процессов релаксации в жидком натрии вплоть до значений  $Q \approx 5 \text{ \AA}^{-1}$  /временная зависимость  $F(Q, t)$  носит немонотонный характер/. Аналогичная картина наблюдается и для жидкого рубидия как в МД-расчетах /3/, так и в экспериментальных нейтронных результатах /6/.

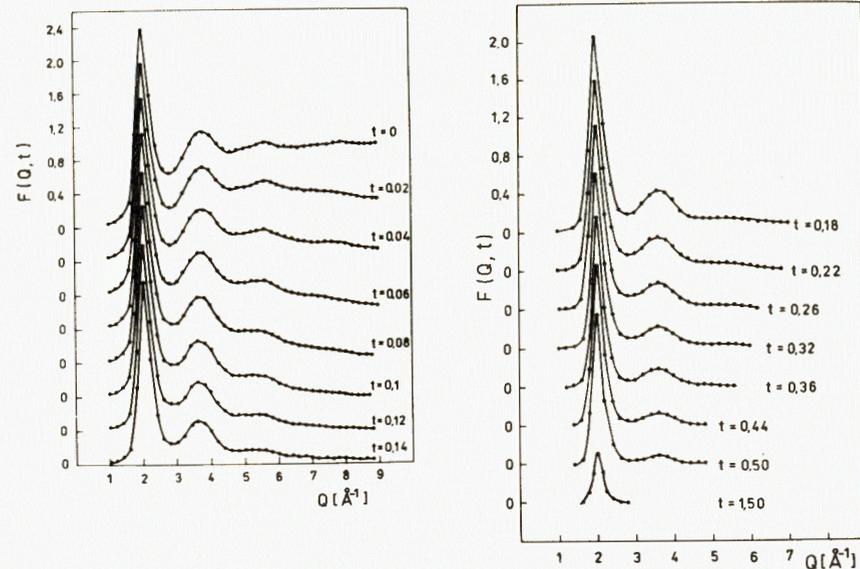


Рис.1. Промежуточная функция рассеяния  $F(Q, t)$  как функция при различном времени /в единицах  $10^{-12}$  с/.

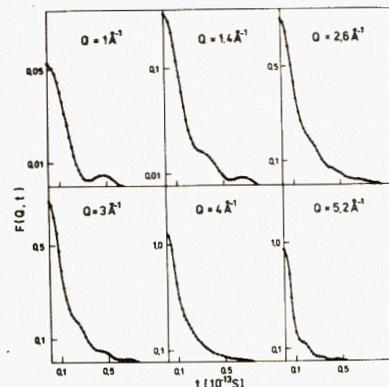


Рис.2. Промежуточная функция рассеяния  $F(Q, t)$  как функция времени для различных значений  $Q$ .

### 4. ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ

Для получения ПВКФ из экспериментальных данных были использованы соотношения /6/ и /7/. Поскольку в сечении рассеяния натрия присутствуют как когерентная, так и некогерентная составляющие, преобразования /6/ и /7/, выполненные с экспериментальными данными, дают комбинацию /12/. Разделение эффектов парных корреляций и автокорреляций может быть проведено лишь в тех областях, где  $G_s(r, t)$  и  $G_d(r, t)$  не перекрываются.

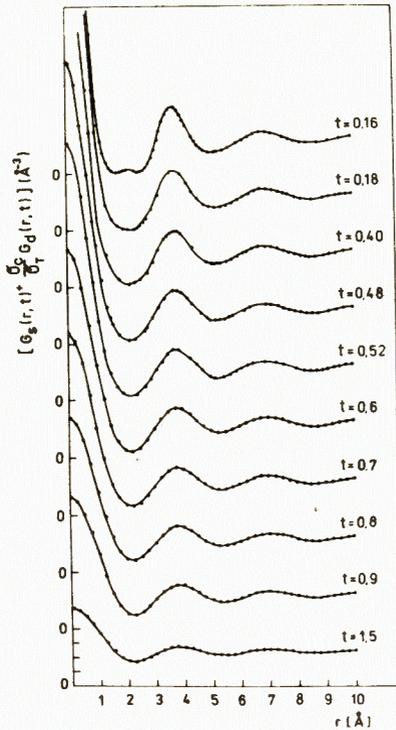


Рис.3. Комбинация  $G_s(r, t) + \frac{\sigma_{\text{ког.}}}{\sigma_{\text{полн.}}} G_d(r, t)$  / в единицах атом/ $\text{\AA}^3$  / как функция расстояния для различных времен /время в единицах  $10^{-12}$  с/.

Рис.4. Парная корреляционная пространственно-временная функция  $G_d(r, t)$  как функция расстояния для различных времен.

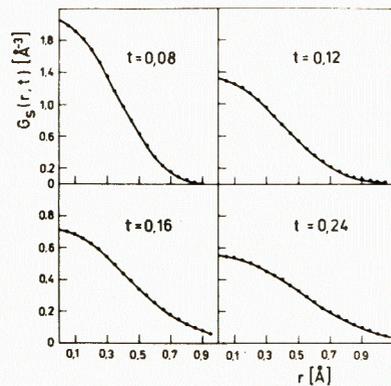
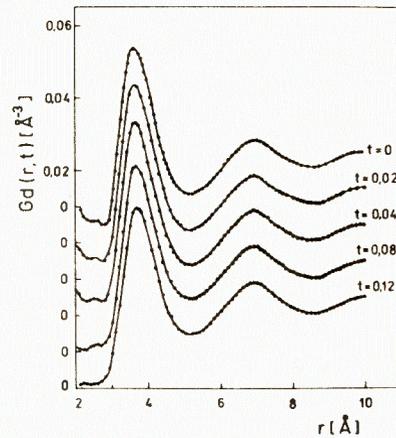


Рис.5. Автокорреляционная пространственно-временная функция  $G_s(r, t)$  как функция расстояния для различных времен.

Для того чтобы выполнить преобразование /6/, необходимо взять интеграл по  $Q$  от 0 до  $\infty$ . Реально в эксперименте промежу-

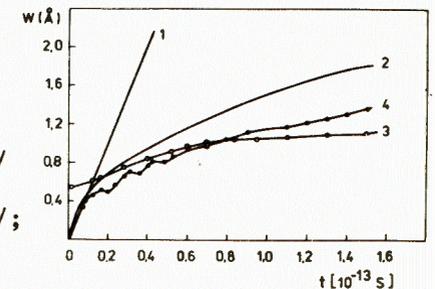
точная функция рассеяния была найдена для  $Q \leq 9 \text{\AA}^{-1}$ , что и бралось в качестве верхнего предела интегрирования в /6/. Как следует из рис.1, при таких значениях  $Q, F(Q, t)$  практически равна 0.

На рис.3 представлены кривые, соответствующие комбинации /12/, содержащей как парные, так и автокорреляции. На рис.4 показана ПКПВФ  $G_d(r, t)$ . Небольшие осцилляции, наблюдаемые в ходе этой функции при малых  $r$  и  $t$ , являются, по-видимому, следствием конечного интегрирования по  $Q$ .

На рис.5 представлены кривые  $G_s(r, t)$ . Из рис.3-5 следует, что  $G_s(r, t)$  и  $G_d(r, t)$  могут быть строго разделены лишь при  $t \leq 0,12 \cdot 10^{-12}$  с. При более длительных временах разделение эффектов автокорреляций и парных корреляций носит лишь приблизительный характер, т.к. область локализации частицы при этих временах уже начинает превышать расстояние между ближайшими соседями  $/r_0 = 3,6 \text{\AA}/$ .

ПКПВФ  $G_d(r, t)$  при  $t = 0$  сводится к  $g(r)$  /см. /3//. В дальнейшем, с ростом времени  $G_d(r, t)$  сохраняет основные черты пространственной структуры, характерные для  $g(r)$ : положение максимумов практически остается постоянным, однако амплитуда пиков уменьшается, а полуширина увеличивается. На рис.6 как функции времени показаны полуширины на половине высоты АКПВФ  $G_s(r, t)$  и ПКПВФ  $G_d(r, t)$ . Последнюю кривую можно считать корреляционной функцией расстояний между ближайшими соседями. На этом же рисунке приведены соответствующие величины, рассчитанные по модели идеального газа и диффузионной модели. Коэффициент самодиффузии жидкого натрия взят таким же, как и в работе /7/. Из рис.6 видно, что при малых временах  $/t \leq 10^{-13}$  с/ атом в начале координат движется со скоростью, характерной для газовой модели. Ранее к аналогичному выводу пришел Рандольф /5/. Используя свои экспериментальные данные по неупругому рассеянию медленных нейтронов, он нашел, что для жидкого натрия ширинная функция  $W^2(t)$  при  $t \leq 10^{-13}$  с носит газоподобный характер. Возвращаясь к рис.6, мы видим, что атом движется как свободная частица лишь в пределах области, составляющей ~15% от расстояния до ближайших

Рис.6. Полуширина автокорреляционной и пространственно-временной функции /точки/ и полуширина на половине высоты первого пика парной корреляционной пространственно-временной функции /кружки/ как функции времени. Кривая 1 - расчет по газовой модели /см. /14//; кривая 2 - расчет по диффузионной модели /см. /14//.



соседей. При промежуточных временах  $10^{-13} \text{с} < t < 10^{-12} \text{с}$  движение атомов носит более сложный характер, т.к. теперь он начинает чувствовать на себе влияние ближайших соседей, в поле которых атом остается вплоть до времени  $t \approx 10^{-12} \text{с}$ . При больших временах  $t > 1,4 \cdot 10^{-12} \text{с}$  движение атома начинает носить диффузионный характер.

Полученная нами экспериментальная кривая смещения атома во времени, приведенная на рис.6, качественно совпадает с результатами расчета, выполненного Паскиным и Раманом для жидкого натрия методом МД /4/.

Заключения, сделанные выше, справедливы для классических систем. В предыдущей работе /7/ было показано, что жидкий натрий при  $T = 413 \text{ К}$  ведет себя подобно классической жидкости. Однако при очень малом времени могут проявляться также и квантовые эффекты. В этом случае ПКПВФ оказывается комплексной. Ее реальная часть связана с флуктуациями плотности системы, а мнимая часть отражает распространение в пространстве и времени локальных возмущений плотности системы. К сожалению, вклад квантовых эффектов оценить очень трудно. Грубо говоря, при анализе пространственно-временных корреляций между частицами следует принимать во внимание две характеристики: эффективный радиус корреляции  $R_0$  и время релаксации корреляций  $\tau_0$ . Первая величина определяет размер пространственной области  $R_0$ , в пределах которой движение данной частицы подвержено влиянию движения других частиц. Вторым параметром ( $\tau_0$ ) характеризует временной интервал, в течение которого возбуждение системы, связанное с движением данного атома, полностью релаксирует. Если расстояние между двумя частицами много больше, чем  $R_0$ , и эти частицы наблюдаются в течение времени, много большего, чем  $\tau_0$ , то корреляциями между движениями этих частиц можно пренебречь.

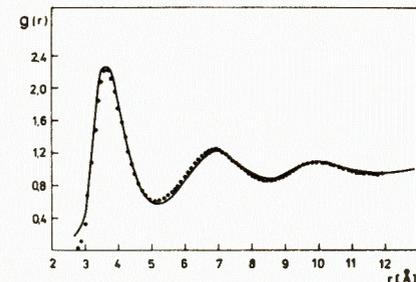
Некоторая информация о размерах области пространственной корреляции и времени релаксации в жидком натрии может быть извлечена из рис.3-5. Из них следует, что пространственная корреляция между частицами существует вплоть до расстояний, превышающих  $\sim 10 \text{ \AA}$ . Видно также, что с ростом времени эти корреляции становятся все более слабыми, и при  $t \geq 1,5 \cdot 10^{-12} \text{ с}$   $G(r, t)$  уже близка к пределу, соответствующему атомной плотности жидкого натрия при данной температуре  $n = 0,0238 \text{ \AA}^{-3} / \text{см.}/4//$ .

## 5. ФУНКЦИЯ РАДИАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ И ПОТЕНЦИАЛ ПАРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Производя фурье-преобразование выражения /15/, представляющего собой структурный фактор, получаем ФРП по соотношению:

$$g(r) = 1 + (2\pi n)^{-1} \int_0^\infty [S(Q) - 1] \frac{Q^2 \sin rQ}{Qr} dQ. \quad /16/$$

Рис.7. Функция радиального распределения  $g(r)$  • - результат настоящей работы, — - результат работы /10/.



Найденная нами ФРП показана на рис.7, где она сравнивается с  $g(r)$  из работы /10/. Структурный фактор  $S(Q)$  в этой работе был получен методом дифракции рентгеновских лучей. Видно, что оба результата весьма близки друг к другу.

Представляется интересным, используя хорошо известные теории, связывающие ФРП и прямую корреляционную функцию

$$C(r) = (2\pi^2 n)^{-1} \int_0^\infty \left[ \frac{S(Q) - 1}{S(Q)} \right] \frac{Q^2 \sin Qr}{Qr} dQ \quad /17/$$

с ППВ, получить последний из наших экспериментальных данных. Это было сделано на основе двух приближений:

Перкуса-Йевики /11/:

$$\phi_{\text{п-й}}(r) = KT \ln[1 - C(r) / g(r)] \quad /18/$$

и гиперцепного /11/:

$$\phi_{\text{гц}}(r) = KT [g(r) - C(r) - 1 - \ln g(r)]. \quad /19/$$

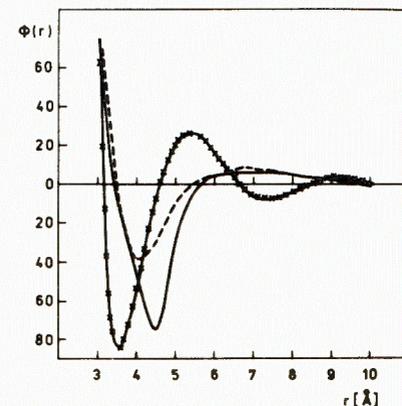


Рис.8. Эффективный потенциал парного взаимодействия  $\phi(r)$  /в МэВ/: — — — настоящая работа, --- - приближение Перкуса-Йевики, \* - настоящая работа, гиперцепное приближение, \* - результат работы /12/.

Полученные результаты представлены на рис.8 вместе с ППВ из работы /12/, использованного нами в /7/ для расчета динамической функции рассеяния  $S(Q, \omega)$  жидкого натрия. Из рис.8. видно, что потенциалы, полученные по /18/ и /19/, отличаются как друг от друга, так и от потенциала /12/. Последний, как указывалось в /7/, дает хорошее согласие расчетных кривых  $S(Q, \omega)$  с экспериментом и, следовательно, может рассматриваться как приемлемый при описании микродинамики жидкого натрия. Таким образом, оказывается еще раз подтвержденным вывод о том, что оба приближения /18/ и /19/, будучи использованы для получения ППВ из структурных данных, дают неудовлетворительные результаты /13/.

Следует заметить, однако, что ППВ /12/, признанный нами выше приемлемым для описания микродинамики жидкого натрия, оказывается сильно отличающимся от ППВ, даваемого в /13/, с помощью которого, как указывается в этой работе, удается описать широкий набор физических свойств жидкого натрия.

Таким образом, ПВКФ, извлеченные из экспериментальных данных по неупругому рассеянию медленных нейтронов жидким натрием, позволяют получить интересную информацию о микродинамике этого вещества и пространственно-временных характеристиках релаксационных процессов, происходящих в нем. Однако использованные нами методы извлечения эффективного ППВ из экспериментальных данных по структуре жидкого натрия, не дают возможности сделать это однозначным образом.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Van Hove L. Phys.Rev., 1954, 95, p.249.
2. Rahman A. Phys.Rev., 1964, 136, p.405.
3. Rahman A. Phys.Rev., 1974, A9, p.1667.
4. Paskin A., Rahman A. Phys.Rev.Lett., 1966, 16, p.300.
5. Randolph P. Phys.Rev., 1964, 134, p.1238.
6. Copley J., Rowe J. Phys.Rev., 1974, A9, p.1656.
7. Пэдуреану И. и др. ОИЯИ, 14-83-806, Дубна, 1983.
8. Гуревич И.И., Тарасов Л.В. Физика нейтронов низких энергий. "Наука", М., 1965.
9. Lovesey S. J.of Phys.C, 1973, 6, p.1956.
10. Greenfield A., Wellendorf J., Wiser H. Phys.Rev., 1971, A4, p.1607.
11. Egelstaff P. An Introduction to the Liquid State. Academic Press, London and New York, 1967.
12. Schiff D. Phys.Rev., 1969, 186, p.151.
13. Bratkovscy A.M., Vaks V.G., Trefilov A.V. J.of Phys.F, 1982, 12, p.611.

Рукопись поступила в издательский отдел  
31 июля 1984 года.

Пэдуреану И. и др.

P14-84-498

Пространственно-временные корреляционные функции  
жидкого натрия

Из экспериментальных данных по динамической функции рассеяния  $S(Q, \omega)$  жидкого натрия при температуре 413 К, полученных в предыдущей работе /7/, извлечена промежуточная функция рассеяния  $F(Q, t)$ , которая используется затем для получения автокорреляционной пространственно-временной функции  $G_s(r, t)$  и парной корреляционной пространственно-временной функции  $G_d(r, t)$ . Промежуточная функция рассеяния  $F(Q, t)$ , которая при  $t \rightarrow 0$  превращается в структурный фактор  $S(Q)$ , позволяет также извлечь функцию радиального распределения  $g(r)$  и прямую корреляционную функцию  $C(r)$ . Последние, в свою очередь, используются для получения эффективного потенциала парного взаимодействия в жидком натрии в рамках приближения Перкуса-Йевица и гиперцепного приближения.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.  
Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод О.С.Виноградовой

Pădureanu I. et al.

P14-84-498

Space-Time Correlation Functions of Liquid Sodium

The experimental dynamic structure factor data obtained in a previous paper are used to get the intermediate scattering function  $F(Q, t)$ . The behaviour of  $F(Q, t)$  is analysed in the space  $(Q, t)$ . From  $F(Q, t)$  the pair space-time correlation function  $G_d(r, t)$  and space-time self-correlation function  $G_s(r, t)$  are derived. As  $F(Q, t=0)$  is just the state structure factor  $S(Q)$  the radial distribution function  $g(r)$  and direct correlation function  $C(r)$  are calculated. The latter is used in the Percus-Yevick and hypernetted chain approximations to obtain the effective pair interaction potential in the liquid sodium.

The investigation has been performed at the Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984